

Tarea 2

Diplomado en Tecnologías Cuánticas

Módulo: Métodos de Simulación Computacional para Sistemas Cuánticos

1. Implementar el algoritmo infinito de DMRG para la cadena de espines con espín $S=1/2$ y $S=1$. Calcular las energías del estado base y comparar sus resultados con los del artículo: Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
2. Reproducir los cálculos y las estimaciones para la energía del átomo de Helio usando funciones gaussianas y DFT, basados en el tratamiento del artículo: J. Chem. Educ. 91, 2116–2123 (2014) y el tratamiento visto en clase.

Nota: Adjuntar en un apéndice los cálculos analíticos necesarios.

3. Utilizando el método de Numerov resolver la ecuación de Schrödinger con $\hbar = 1, m = 1, \omega = 1, V(x) = \omega(x^4 - 2x^2)$, un doble pozo. Calcular las primeras 10 eigen-funciones y las correspondientes energías.
 4. Utilizando los mismos parámetros de 3. Encontrar el estado base haciendo evolución en tiempo imaginario con el método de split-step de la ecuación de Gross-Pitaevskii (GPE) para diferentes valores de la amplitud del término no-lineal (variando la constante $g > 0$).
- I) Comparar la solución numérica de la GPE para: $0 < g < 1$ con la solución sin el término no lineal.
 - II) Calcular la solución analítica en el límite de Thomas-Fermi y comparar con la solución numérica para $g \gg 1$.

Fecha de entrega: 27 de Junio de 2024, 23:59 h.